

Переключение поляризации в наноразмерных композитах на основе полимерных сегнетоэлектриков и внедренных слоев графена: молекулярно-динамическое моделирование

В.С. Быстров¹, Е.В. Парамонова¹, Hong Shen², Xiangjian Meng³, В.М. Фридкин³

¹Институт математических проблем биологии РАН — филиал ФИЦ Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, 142290 Пущино, Россия
e-mail: vsbys@mail.ru

²Шанхайский институт технической физики, Академия наук Китая, 2000836 Шанхай, Китай

³ФНИЦ Кристаллографии и фотоники РАН; Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, 119333 Москва, Россия

В данной работе проведено исследование наноразмерной композитной наноструктуры, содержащей сегнетоэлектрический полимер ПВДФ и слои графена, методами молекулярного моделирования и квантовой молекулярной динамики (МД) с полуэмпирическим квантово-химическим методом PM3 (все из программного пакета HyperChem). Рассмотрены модели композитной структуры «ПВДФ+Графен» с одним слоем графена и ПВДФ; двухслойные модели слоев графена и ПВДФ (сэндвич-структуры). Для всех таких моделей рассматриваемых 2D-материалов проведены расчеты петель гистерезиса и определены времена переключения поляризации.

Установлено, что внедрение (добавление) слоев графена в сегнетоэлектрический полимер ПВДФ увеличивает коэрцитивное поле и уменьшает времена переключения поляризации этой композитной гетероструктуры по сравнению с исходным чистым ПВДФ сегнетоэлектриком [1]. Анализируется описание кинетики этого эффекта при изменении коэффициента демпфирования в уравнении Ландау-Халатникова в рамках феноменологической теории Ландау-Гинзбурга-Девоншира для 2D-сегнетоэлектриков [2].

Следует отметить, что в работах [3, 4], в которых были экспериментально изучены свойства аналогичного композита «ПВДФ + графен», но для более сложного состава (включающих оксид графена и П(ВДФ-ТрФЭ)) было обнаружено, что добавление графена/оксида графена (при некоторых их концентрациях) увеличивает значение коэрцитивного поля (а также значения пьезоэлектрического коэффициента) по сравнению с чистой полимерной композицией.

На основе полученных результатов расчетов могут быть предложены и построены новые составы таких нано- и гетероструктур для наноразмерных композитов полимерных сегнетоэлектриков с внедренными слоями графена/оксида графена, которые позволят регулировать времена переключения поляризации и величины коэрцитивных полей. Это открывает новые возможности для создания таких устройств, как различные датчики, сенсоры и т.п. Такие 2D-композиты перспективны и в производстве фотоприемников [5].

Авторы благодарны Российскому фонду фундаментальных исследований (РФФИ): гранты № 19-01-00519_А и № 20-51-53014_ГФЕН_А. Профессор Xiangjian Meng выражает свою благодарность Национальному фонду естественных наук Китая (NNSFC) за грант № 61574151 и профессор Hong Shen – за грант № 62011530043.

1. V.S. Bystrov, E.V. Paramonova, et al., *Nanomaterials Science and Engineering* **3**(1), 5-13 (2021).
2. В.С. Быстров, В.М. Фридкин. *УФН*, **190**(11), 1217 (2020).
3. M.V. Silibin, V.S. Bystrov, D.V. Karpinsky, et al., *Applied Surface Science* **421**(A), 42 (2017).
4. M. Silibin, D. Karpinsky, V. Bystrov, et al., *Journal of Carbon Research* **5**(3), 48 (2019).
5. Xudong Wang, Peng Wang, Jianlu Wang, et al., *Adv. Mater.* **27**, 6575 (2015).